

ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ВИСМУТА НА СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА $GaAs_{1-y}Bi_y$: РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

О.В. Девицкий^{1,2}

¹ФГБУН «Федеральный исследовательский центр Южный научный центр РАН»
344006, Россия, Ростов-на-Дону, пр. Чехова, 41

²ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»
355017, Россия, Ставрополь, ул. Пушкина, 1
v2517@rambler.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.404

Аннотация: Представлено теоретическое исследование влияния концентрации висмута на структурные и электронные свойства твердого раствора $GaAs_{1-y}Bi_y$ с использованием теории функционала плотности в программном пакете VASP 5.4.4. Результаты исследования показали, что фундаментальная запрещенная зона $GaAs_{1-y}Bi_y$ увеличение концентрации висмута приводит к увеличению постоянной решетки $GaAs_{1-y}Bi_y$, что вызывает внутреннюю асимметрию и снижению длины связи $Ga-Bi$. Показано, что при увеличении количества замещающих атомы As атомов Bi в узлах кристаллической решетки наблюдается искажение положения соседних атомов Ga и уменьшение длины связи $Ga-As$. Установлено, что эти изменения обусловлены влиянием соседнего атома Bi , который влияет на длину связи $Ga-Bi$ и снижает её длину вплоть до 2,6133 Å при y равном 12,5%. Угол между связями $Ga-Bi$ и $Ga-As$ наоборот увеличивается при увеличении концентрации Bi и может достигать максимального значения в 110,9256°. Совокупность подобных структурных изменений кристаллической решетки $GaAs_{1-y}Bi_y$ в дальнейшем приводят к возникновению потенциальных дефектов в виде кластеризации атомов Bi или смещения атома Bi положение интерстиции. Установлено, что наиболее стабильной конфигурацией обладают суперячейки $GaAs_{1-y}Bi_y$ с концентрацией атомов Bi до 12,5%. Ширина запрещенной зоны твердого раствора $GaAs_{1-y}Bi_y$ уменьшается от 1,283 эВ до 0,712 эВ с увеличением концентрации висмута от 1,85 мол.% до 12,5 мол.%. Полученные значения ширины запрещенной зоны в целом близки к известным литературным данным. Это показывает, что прямая запрещенная зона этого сплава охватывает спектральную область от ближнего инфракрасного до инфракрасного диапазона.

Ключевые слова: III-V-Bi, $GaAs_{1-y}Bi_y$, электронная структура, теория функционала плотности, ширина запрещенной зоны.

1. Введение

Многокомпонентные полупроводниковые твердые растворы III-V широко применяются в современной оптоэлектронике, например, в таких направлениях как: телекоммуникации, системы дистанционного управления, медицинской диагностики, детекторы химических и биологических агентов, системы спутникового зондирования атмосферы и поверхности Земли, системы и дискретные приборы военного и космического назначения [1-6]. Одним из наиболее перспективных твердых растворов III-V являются так называемые разбавленные висмутиды III-V-Bi для которых в работе [7] было теоретически

предсказана возможность преодоления нескольких фундаментальных недостатков светоизлучающих устройств ближнего и среднего инфракрасного диапазона, обусловленных оже-рекомбинацией и спин-орбитальным расщеплением в валентной зоне. В работе [8] было обнаружено, что среди прочих элементов V -группы, Bi приводит к сильному уменьшению запрещенной зоны твердых растворов вплоть до 90 мэВ/мол.% Bi , что открывает возможность расширения спектрального диапазона в среднюю ИК-область за счет инжиниринга запрещенной зоны. Причиной повышенного научного интереса к $III-V-Bi$ полупроводниковым материалам является эффект антипересечения в валентной зоне (VBAC) [9]. В работе [10] было установлено, что при введении небольших концентраций Bi в состав $III-V$ создаются уровни энергии в валентной зоне матричного материала, вызывая их взаимодействие с антипересечением уровней дырок. В результате VBAC эффекта валентная зона разделяется на шесть поддиапазонов валентности. Такая структура валентной зоны не подходит для создания материалов, работающих в средней и дальней области ИК из-за фундаментальных проблем с оже-рекомбинацией и внутризонным поглощением, которые доминируют в ИК-излучателях. Для подавления оже-рекомбинации необходимо реализовать условия, когда энергия спин-орбитального расщепления (Δ_{so}) станет больше энергии запрещенной зоны (E_g) [11]. Теоретически установлено, что соединения с Bi и Sb имеют наибольшую энергию спин-орбитального расщепления [12]. В работе [13] было продемонстрировано, как процессы оже-рекомбинации влияют на пороговый ток ИК лазеров. Видно, что в твердых растворах со Sb можно добиться реализации условия, когда энергия Δ_{so} станет больше энергии запрещенной зоны E_g и подавить оже-процессы. То есть открывается возможность создания термически устойчивых инжекционных полупроводниковых лазеров на основе наногетероструктур $III-V-Bi$. Необычные свойства зонной структуры твердых растворов $III-V-Bi$ предоставляют потенциальный путь для достижения условия $\Delta_{so} > E_g$ и использования их для приборов для ближнего и среднего ИК-диапазона. Данный факт показывает высокую практическую актуальность разработки и исследования такого класса материалов. Для достижения описанных выше эффектов необходимо изучить влияние висмута на энергетический сдвиг ширины запрещенной зоны твердых растворов, а также на их структурные параметры для создания гетероструктур. В работе [14] было обнаружено, что изменение концентрации Bi оказывает значительное влияние на электронные и оптические свойства $GaAs_{1-y}Bi_y$. Было отмечено, что при внедрения атомов Bi вместо As наблюдается уменьшение

запрещенной зоны $GaAs_{1-y}Bi_y$. В работах [15] были исследованы сжимающие деформации $GaAs_{1-y}Bi_y$ возникающие при изменении концентрации Bi .

Целью данной работы является исследование влияния содержания висмута на структурные и электронные свойства $GaAs_{1-y}Bi_y$ при расчете с использованием теории функционала плотности.

2. Параметры моделирования

Для анализа электронных и структурных свойств было проведено численные расчеты с использованием теории функционала плотности (DFT) в программном пакете VASP 5.4.4 [16]. Электронный обменно-корреляционный функционал рассматривался в приближении обобщенного градиента (GGA), предложенном Perdew-Burke-Ernzerhofform (PBE).

Твердый раствор $GaAs_{1-y}Bi_y$ моделировался с использованием периодических суперячеек, содержащих $4\times 4\times 4$ и $2\times 2\times 2$ элементарных ячеек цинковой обманки с 108 и 32 атомами Ga и As . Четыре или два атома As в этих суперячейках были заменены Bi , что привело к концентрациям Bi : 1,85%; 3,7%; 6,25% и 12,5 % от общего количества атомов V группы.

Все конфигурации суперячеек $GaAs_{1-y}Bi_y$ были получены путем полной структурной релаксации. Ион-электронное взаимодействие описывалось методом присоединенных плоских волн (PAW), энергия отсечки которого составляла 300 эВ. Заселенности орбит были размыты методом Метфесселя-Пакстона первого порядка с шириной размытия 0,05 эВ. Локальная оптимизация геометрии кластера проводилась до тех пор, сила Хеллмана-Фейнмана, действующая на каждый атом, не уменьшится до уровня менее 0,01 эВ/Å. Результаты расчетов суперячеек $GaAs_{1-y}Bi_y$ были обработаны и визуализированы с помощью Vesta [17] и Vaspkit 0.83 [18].

3. Результаты и обсуждения

На рис. 1 представлены релаксированные суперячейки $GaAs_{1-y}Bi_y$ при y равном 1,85%; 3,7%; 6,25% и 12,5%. Из рис. 1 видно, что при увеличении концентрации Bi в узлах решетки наблюдается искажение положения соседних атомов Ga и уменьшение длины связи $Ga-As$. Такие изменения прежде всего обусловлены влиянием соседнего атома Bi , который влияет на длину связи $Ga-Bi$ и снижает её длину вплоть до 2,6133 Å при y равном 12,5%. Угол между связями $Ga-Bi$ и $Bi-Ga$ наоборот увеличивается при увеличении концентрации Bi . Такие

структурные изменения в кристаллической решетке $GaAs_{1-y}Bi_y$ в дальнейшем приводят к возникновению потенциальных дефектов в виде кластеризации атомов Bi [15] или положения интерстиции атома Bi [3].

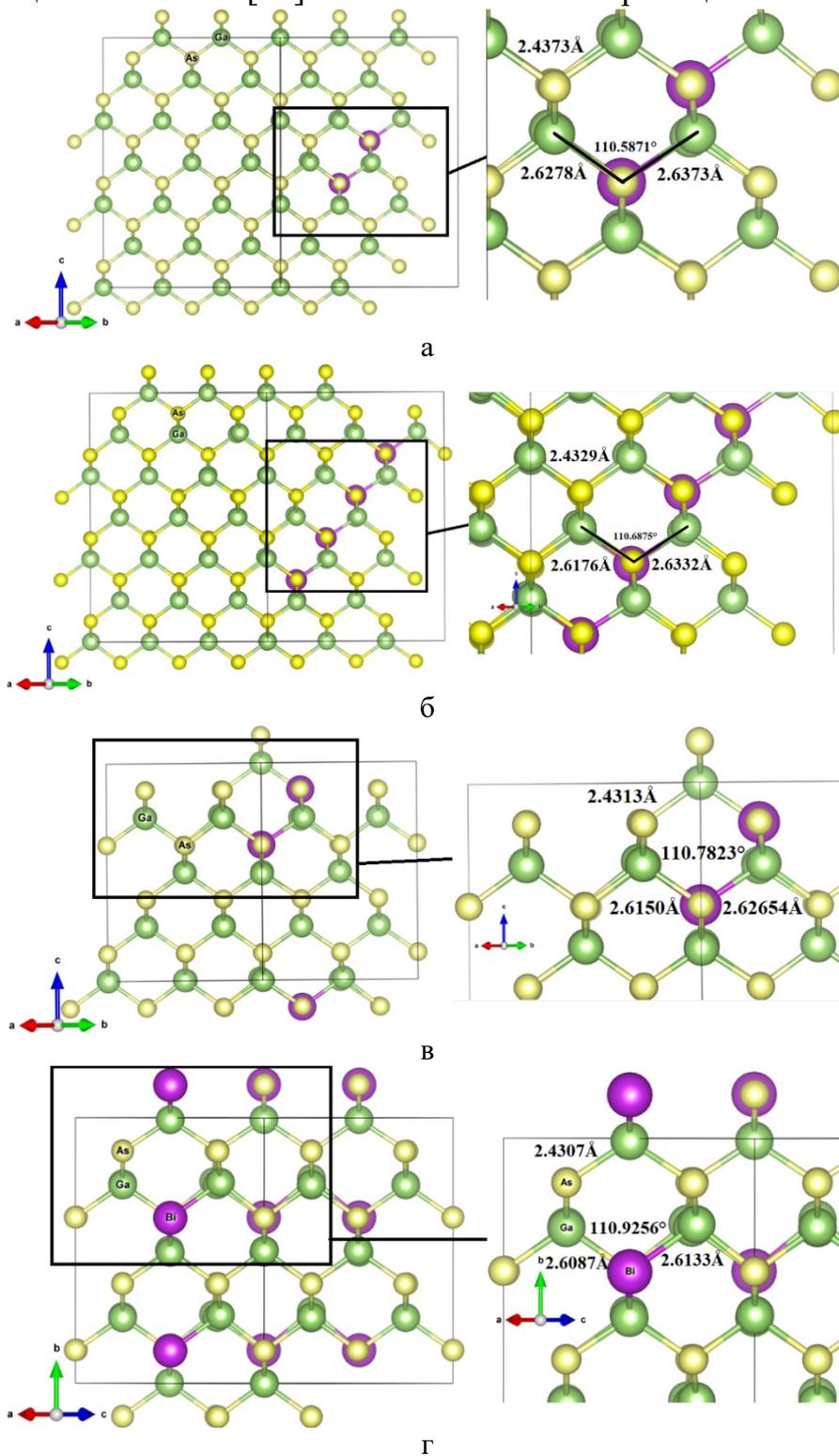


Рис. 1. Релаксированные суперячейки $GaAs_{1-y}Bi_y$ при y равном 1,85 % (а); 3,7 % (б); 6,25 % (в) и 12,5 % (г).

На рис. 2 показаны зависимости ширины запрещенной зоны и постоянной кристаллической решетки от концентраций атомов Bi . Уменьшение величины ширины запрещенной зоны твердого раствора $GaAs_{1-y}Bi_y$ имеет нелинейный, в целом совпадает с данными в работе [12].

При всех выбранных концентрациях Bi для твердого раствора $GaAs_{1-y}Bi_y$ наблюдалась прямая ширина запрещенной зоны. Её величина уменьшалась от 1,283 эВ до 0,712 эВ с увеличением концентрации Bi от 1,85 мол.% до 12,5 мол.%. Величина постоянной решетки рассчитывалась в пересчете на элементарную кристаллическую ячейку $GaAs_{1-y}Bi_y$. Из рис. 2 видно, что при увеличении концентрации Bi постоянная решетки $GaAs_{1-y}Bi_y$ линейно увеличивается.

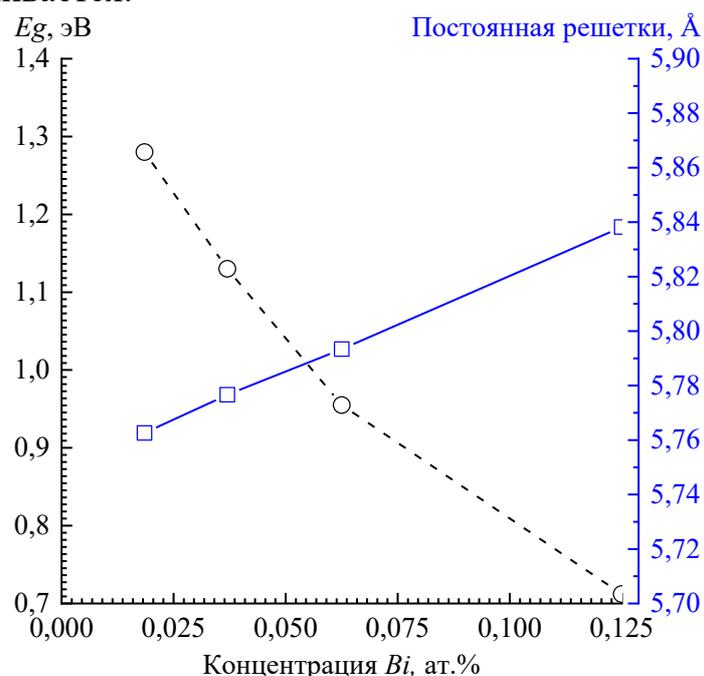


Рис. 2. Зависимости ширины запрещенной зоны и постоянной кристаллической решетки от концентраций атомов Bi в твердом растворе $GaAs_{1-y}Bi_y$.

Полученные результаты демонстрируют явное влияние концентрации и положения атомов Bi на структурные и электронные свойства твердого раствора $GaAs_{1-y}Bi_y$. Для более точного и крупномасштабного моделирования твердых растворов $III-V$ и в том числе $GaAs_{1-y}Bi_y$ требуются модели, в которых учитывается не только непосредственное взаимодействия пар атомов Bi с Ga и As , но и дальнедействующие взаимодействия между атомами Bi .

5. Заключение

В данной работе было проведено теоретическое исследование влияния концентрации висмута на структурные и электронные свойства

твердого раствора $GaAs_{1-y}Bi_y$ с использованием теории функционала плотности. Определены зависимости ширины запрещенной зоны и постоянной кристаллической решетки твердого раствора $GaAs_{1-y}Bi_y$ от концентраций атомов Bi . Установлено, что наиболее стабильной конфигурацией обладают суперячейки $GaAs_{1-y}Bi_y$ с концентрацией атомов Bi до 12,5 %.

Публикация подготовлена в рамках реализации государственного задания «Разработка новых полупроводниковых материалов на основе многокомпонентных твердых растворов для фотонных, оптоэлектронных и СВЧ применений» (номер государственной регистрации 122020100326-7), а также с использованием ресурсов центра коллективного пользования Северо-Кавказского федерального университета и при финансовой поддержке Минобрнауки России, уникальный идентификатор проекта RF-2296.61321X0029 (соглашение № 075-15-2021-687).

Библиографический список:

1. **Marko, I.P.** Progress toward III-V bismide alloys for near- and midinfrared laser diodes / I.P. Marko, S.J. Sweeney // IEEE Journal of Quantum Electronics. – 2017. – V. 23. – I. 6. – Art. № 1501512. – 12 p. DOI: 10.1109/JSTQE.2017.2719403.
2. **Sweeney, S.J.** Bismide-nitride alloys: promising for efficient light emitting devices in the near and mid-infrared / S.J. Sweeney, S.R. Jin // Journal Applied Physics. – 2013. – V. 113. – I. 4. – P. 043110-1-043110-6. DOI: 10.1063/1.4789624.
3. **Rockett, T.B.O.** Influence of growth conditions on the structural and opto-electronic quality of GaAsBi / T.B.O. Rockett, R.D. Richards, Y. Gu et al. // Journal of Crystal Growth. – 2017. – V. 477. – P. 139-143. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2017.02.004.
4. **Pashchenko, A.S.** Structure and morphology of GaInAsP solid solutions on GaAs substrates grown by pulsed laser deposition / A.S. Pashchenko, O.V. Devitsky, L.S. Lunin et al. // Thin Solid Films. – 2022. – V. 743. – Art. № 139064. – 8 p. DOI: 10.1016/j.tsf.2021.139064.
5. **Lunin, L.S.** Pulsed laser deposition of $Al_xGa_{1-x}As$ and GaP thin films onto Si substrates for photoelectric converters / L.S. Lunin, M.L. Lunina, O.V. Devitsky et al. // Semiconductor. – 2017. – V. 51. – I. 3. – P. 387-391. DOI: 10.1134/S1063782617030174.
6. **Zhang, Y.** Similar and dissimilar aspects of III-V semiconductors containing Bi versus N / Y. Zhang, A. Mascarenhas // Physical Review B. – 2005. – V. 71. – I. 15. – P. 155201-1-155201-4. DOI: 10.1103/PhysRevB.71.155201.
7. **Sweeney, S.J.** Bismide-based photonic devices for near- and mid-infrared applications / S.J. Sweeney, I.P. Marko, S.R. Jin et al. // In: Bismuth-Containing Compounds. Springer Series in Materials Science. – New York: Springer, 2013 – V. 186. – P. 29-53. DOI: 10.1007/978-1-4614-8121-8_2.
8. **Wang, L.** Novel dilute bismide, epitaxy, physical properties and device application / L. Wang, L. Zhang, L. Yue et al. // Crystals. – 2017. – V. 63. – I. 3. – Art. no. 63. – 62 p. DOI: 10.3390/cryst7030063.
9. **Alberi, K.** Valence-band anticrossing in mismatched III-V semiconductor alloys / K. Alberi, J. Wu, W. Walukiewicz et al. // Physical Review B. – 2007. – V. 75. – I. 4. – P. 045203-1-045203-6. DOI: 10.1103/PhysRevB.75.045203.
10. **Samajdar, D.P.** Influence of Bi-related impurity states on the bandgap and spin-orbit splitting energy of dilute III-V-Bi alloys: $InP_{1-x}Bi_x$, $InAs_{1-x}Bi_x$, $InSb_{1-x}Bi_x$ and $GaSb_{1-x}Bi_x$ / D.P. Samajdar, S. Dhar // Superlattices and Microstructures. – 2016. – V. 89. – P. 112-119. DOI: 10.1016/j.spmi.2015.10.048.
11. **Ammar, I.** Optical gain and threshold current density for mid-infrared GaSbBi/GaSb quantum-well laser structure / I. Ammar, N. Sfina, M. Fnaiech // Materials Science and Engineering: B. – 2021. – V. 266. – Art. № 115056. – 10 p. DOI: 10.1016/j.mseb.2021.115056.
12. **Madouri, D.** Bismuth alloying in GaAs: a first-principles study / D. Madouri, A. Boukra, A. Zaoui et al. // Computational Materials Science. – 2008. – V. 43. – I. 4. – P. 818-822. DOI: 10.1016/j.commatsci.2008.01.059.
13. **Lewis, R.B.** $GaAs_{1-x}Bi_x$ light emitting diodes / R.B. Lewis, D.A. Beaton, X. Lu et al. // Journal of Crystal Growth. – 2009. – V. 311. – I. 7. – P. 1872-1875. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2008.11.093.

14. **Takahiro, K.** Structural characterization of GaAs_{1-x}Bi_x alloy by rutherford backscattering spectrometry combined with the channeling technique / K. Takahiro, K. Kawatsura, K. Oe et al. // *Journal of Electronic Materials*. – 2003. – V. 32. – I. 1. – P. 34-37. DOI: 10.1007/s11664-003-0250-8.
15. **Adamji, H.** Density functional theory analysis of the effect of structural configurations on the stability of GaAsBi compounds / H. Adamji, M. Stevens, K. Grossklaus et al. // *Computational Materials Science*. – 2020. – V. 173. – Art. № 109401. – 12 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2019.109401.
16. **Zhen, G.** Janus XM_oAZ₂ (X = S, Se, Te; A = Si, Ge; Z = N, P, As) monolayers: First-principles insight into electronic structures, optical and photocatalytic properties / G. Zhen, H. Xin, L. Wenzhong // *Applied Surface Science*. – 2023. – V. 639. – Art. № 158146. – 13 p. DOI: 10.1016/j.apsusc.2023.158146.
17. **Momma, K.** VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data / K. Momma, F. Izumi// *Journal of Applied Crystallography*. – 2011. – V. 44. – I. 6. – P. 1272-1276. DOI: 10.1107/S0021889811038970.
18. **Wang, V.** VASPKIT: a user-friendly interface facilitating high-throughput computing and analysis using VASP code / V. Wang, N. Xu, J.-C. Liu et al. // *Computer Physics Communications*. – 2021. – V. 267. – Art. № 108033. – 19 p. DOI: 10.1016/j.cpc.2021.108033.

References:

1. Marko I.P., Sweeney S.J. Progress toward III-V bismide alloys for near- and midinfrared laser diodes, *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 2017, vol. 23, issue 6, art. no. 1501512, 12 p. DOI: 10.1109/JSTQE.2017.2719403.
2. Sweeney S.J., Jin S.R. Bismide-nitride alloys: promising for efficient light emitting devices in the near and mid-infrared, *Journal Applied Physics*, 2013, vol. 113, issue 4, pp. 043110-1-043110-6. DOI: 10.1063/1.4789624.
3. Rockett T.B.O., Richards R.D., Gu Y. et al. Influence of growth conditions on the structural and opto-electronic quality of GaAsBi, *Journal of Crystal Growth*, 2017, vol. 477, pp. 139-143. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2017.02.004.
4. Pashchenko A.S., Devitsky O.V., Lunin L.S. et al Structure and morphology of GaInAsP solid solutions on GaAs substrates grown by pulsed laser deposition, *Thin Solid Films*, 2022, vol. 743, art. no. 139064, 8 p. DOI: 10.1016/j.tsf.2021.139064.
5. Lunin L.S., Lunina M.L., Devitsky O.V. et al. Pulsed laser deposition of Al_xGa_{1-x}As and GaP thin films onto Si substrates for photoelectric converters, *Semiconductor*, 2017, vol. 51m issue 3. pp. 387-391. DOI: 10.1134/S1063782617030174.
6. Zhang Y., Mascarenhas A. Similar and dissimilar aspects of III-V semiconductors containing Bi versus N, *Physical Review B*, 2005, vol. 71, issue 15, pp. 155201-1-155201-4. DOI: 10.1103/PhysRevB.71.155201.
7. Sweeney S.J., Marko S.J., Jin S.R. et al. Bismide-based photonic devices for near- and mid-infrared applications, *Bismuth-Containing Compounds. Springer Series in Materials Science*, New York, Springer, 2013, vol. 186, pp. 29-53. DOI: 10.1007/978-1-4614-8121-8_2.
8. Wang L., Zhang L., Yue L. et al. Novel dilute bismide, epitaxy, physical properties and device application, *Crystals*, 2017, vol. 63, issue 3, art. no. 63, 62 p. DOI: 10.3390/cryst7030063.
9. Alberi K., Wu J., Walukiewicz W. et al. Valence-band anticrossing in mismatched III-V semiconductor alloys, *Physical Review B*, 2007, vol. 75, issue 4, pp. 045203-1-045203-6. DOI: 10.1103/PhysRevB.75.045203.
10. Samajdar D.P., Dhar S. Influence of Bi-related impurity states on the bandgap and spin-orbit splitting energy of dilute III-V-Bi alloys: InP_{1-x}Bi_x, InAs_{1-x}Bi_x, InSb_{1-x}Bi_x and GaSb_{1-x}Bi_x, *Superlattices and Microstructures*, 2016, vol. 89, pp. 112-119. DOI:10.1016/j.spmi.2015.10.048.
11. Ammar I., Sfina N., Fnaiech M. Optical gain and threshold current density for mid-infrared GaSbBi/GaSb quantum-well laser structure, *Materials Science and Engineering: B*, 2021, vol. 266, art. no. 115056, 10 p. DOI: 10.1016/j.mseb.2021.115056.
12. Madouri D., Boukra A., Zaoui A. et al. Bismuth alloying in GaAs: a first-principles study, *Computational Materials Science*, 2008, vol. 43, issue 4, pp. 818-822. DOI: 10.1016/j.commatsci.2008.01.059.
13. Lewis R.B., Beaton D.A., Lu X. et al. GaAs_{1-x}Bi_x light emitting diodes, *Journal of Crystal Growth*, 2009, vol. 311, issue 7, pp. 1872-1875. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2008.11.093.
14. Takahiro K., Kawatsura K., Oe K. et al. Structural characterization of GaAs_{1-x}Bi_x alloy by rutherford backscattering spectrometry combined with the channeling technique, *Journal of Electronic Materials*, 2003, vol. 32, issue 1, pp. 34-37. DOI: 10.1007/s11664-003-0250-8.
15. Adamji H., Stevens M., Grossklaus K. et al. Density functional theory analysis of the effect of structural configurations on the stability of GaAsBi compounds, *Computational Materials Science*, 2020, vol. 173, art. no. 109401, 12 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2019.109401.

16. Zhen G., Xin H., Wenzhong L. Janus XMoAZ_2 ($X = \text{S, Se, Te}$; $A = \text{Si, Ge}$; $Z = \text{N, P, As}$) monolayers: First-principles insight into electronic structures, optical and photocatalytic properties, *Applied Surface Science*, 2023, vol. 639. art. no. 158146, 13 p. DOI: 10.1016/j.apsusc.2023.158146.
17. Momma K., Izumi F. VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data, *Journal of Applied Crystallography*, 2011, vol. 44. issue 6. pp. 1272-1276. DOI: 10.1107/S0021889811038970.
18. Wang V., Xu N., Liu J.-C. et al. VASPKIT: a user-friendly interface facilitating high-throughput computing and analysis using VASP code, *Computer Physics Communications*, 2021, vol. 267, art. no. 108033, 19 p. DOI: 10.1016/j.cpc.2021.108033.

Short Communication

**EFFECT OF BISMUTH CONTENT ON THE STRUCTURAL AND ELECTRONIC
PROPERTIES OF $\text{GaAs}_{1-y}\text{Bi}_y$: FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS**

O.V. Devitsky^{1,2}

¹*Federal Research Centre The Southern Scientific Centre of The RAS, Rostov-on-Don, Russia*

²*North Caucasus Federal University, Stavropol, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.404

Abstract: A theoretical study of the effect of bismuth concentration on the structural and electronic properties of the $\text{GaAs}_{1-y}\text{Bi}_y$ solid solution is presented using the density functional theory in the VASP 5.4.4 software package. The results of the study showed that the fundamental band gap $\text{GaAs}_{1-y}\text{Bi}_y$ increase in the concentration of bismuth leads to an increase in the $\text{GaAs}_{1-y}\text{Bi}_y$ lattice constant, which causes internal asymmetry and a decrease in the Ga-Bi bond length. It has been shown that, with an increase in the number of Bi atoms substituting As atoms, a distortion of the position of neighboring Ga atoms and a decrease in the Ga-As bond length are observed at the sites of the crystal lattice. It has been established that these changes are due to the influence of the neighboring Bi atom, which affects the Ga-Bi bond length and reduces its length down to 2,6133 Å at y equal to 12,5%. The angle between the Ga-Bi and Ga-As bonds, on the contrary, increases with increasing Bi concentration and can reach a maximum value of 110,9256°. The combination of such structural changes in the crystal lattice of $\text{GaAs}_{1-y}\text{Bi}_y$ further lead to the emergence of potential defects in the form of clustering of Bi atoms or displacement of the Bi atom in the position of the interstitium. It has been established that supercells have the most stable configuration. $\text{GaAs}_{1-y}\text{Bi}_y$ with a concentration of Bi atoms up to 12,5%. The band gap of the $\text{GaAs}_{1-y}\text{Bi}_y$ solid solution decreases from 1,283 eV to 0,712 eV with increasing bismuth concentration from 1,85 mol.% to 12,5 mol.%. The band gap values obtained are, on the whole, close to known literature data. This shows that the direct band gap of this alloy covers the spectral region from the near infrared to the infrared range.

Keywords: *III-V-Bi, $\text{GaAs}_{1-y}\text{Bi}_y$, electronic structure, density functional theory, band gap.*

Девицкий Олег Васильевич – к.т.н., ведущий научный сотрудник лаборатории физики и технологии полупроводниковых наногетероструктур для СВЧ-электроники и фотоники ФГБУН «Федеральный исследовательский центр Южный научный центр РАН»; старший научный сотрудник научно-образовательного центра фотовольтаики и нанотехнологии ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет».

Oleg V. Devitsky – Ph. D., Leading Researcher, Laboratory of Physics and Technology of Semiconductor Nanoheterostructures for Microwave Electronics and Photonics, Federal Research Center Southern Scientific Center of the RAS, Senior Researcher, Scientific and Educational Center for Photovoltaics and Nanotechnology, North Caucasus Federal University.

Поступила в редакцию/received: 05.09.2023; после рецензирования/reviised: 04.10.2023; принята/accepted: 07.10.2023.